函数の直交多項式展開 : 選点補間多項式による函数の逐次近似 (数値解析の基礎理論研究会報告集)

鳥居, 達生

数理解析研究所講究録
72巻 1969年 83-96

函数の直交多項式展開
— 選点補間多項式による函数の逐次近似

阪大 工学部　鳥居達生

1. はじめに

区間 $[a,b]$ と重み函数 $w(x)$ に対して定まる直交多項式系を $\{\varphi_r(x)\}$ とする. 離散点 $x_k^{(n)} \in [a,b]$, $k=1,2,\cdots,n$ における与えられた函数の値を用い, 補間法によって $f(x)$ を $\{\varphi_r(x)\}$ で展開する. すなわち

$$\left.\begin{aligned} L_n(f,\varphi;x) &= c_0^{(n)}\varphi_0(x)+c_1^{(n)}\varphi_1(x)+\cdots+c_{n-1}^{(n)}\varphi_{n-1}(x) \\ L_n(f,\varphi;x_k^{(n)}) &= f(x_k^{(n)}), \quad k=1,2,\cdots,n. \end{aligned}\right\} \quad (1.1)$$

補間点 $x_k^{(n)}$ が $\varphi_n(x)$ の零点ならば

$$S_m(x) = c_0^{(n)}\varphi_0(x)+c_1^{(n)}\varphi_1(x)+\cdots+c_m^{(n)}\varphi_m(x), \quad m<n \quad (1.2)$$

は, $f(x)$ の次の意味での最小二乗近似式である.

$$\min_{\{c_r\}} \sum_{k=1}^{n} \lambda_k \left(f(x_k^{(n)}) - S_m(x_k^{(n)}) \right)^2 \quad (1.3)$$

λ_k; Gauss型数値積分公式の重み係数.

とくに $m=n$ ならば $S_n(x) \equiv L_n(f,\varphi;x)$. すなわち $S_n(x)$ は $f(x)$ の離散的最小二乗近似式であると同時に補間式になっ

ている．$S_n(x)$ の項数 n を n_1 から $n_2>n_1$ に増すと $\varphi_{n_1}(x)$ と $\varphi_{n_2}(x)$ の零点は，すべて相異なるから $S_{n_1}(x)$ のために要した $f(x)$ の値は $S_{n_2}(x)$ をつくるときに利用できない．

所要の精度に応じて，項数 n を函数値 $f(x)$ の計算回数を可能な限り少なくして，機械的に決定したい．厳密な意味で，この問題を解くことは困難である．$f(x)$ を最小二乗近似式の列 $\{S_r(x)\}$ で r を増しながら近似してゆく代りに，補間式の列 $\{L_r(f,\varphi;x)\}$ で $f(x)$ を近似する．この際 $f(x)$ の計算回数を少なくするためには，補間点を1点づつ追加しながら，補間式の次数を高くしてゆけばよい．

補間式の剰余項については，$f(x)$ の性質と補間点の分布と関連づけて古くから多くの研究がある．数値計算の上で，とくに問題となることは補間法の（数値的）安定性であろう．

2．補間法の安定性

補間式を数値的につくるとき，二種類の丸め誤差が発生する．第一に函数値 $f(x)$ の計算誤差 $\delta f(x)$，第二に補間法の四則演算の丸め誤差である．第二の誤差は通常第一の誤差に比較して小さいので，簡単のためここでは無視する．

n 個の点における $f(x)$ の補間式をあらためて $L_n(f;x)$ とする．$\delta f(x)$ に基づく補間式の伝播誤差を定義する：

$$L_n(\delta f;x) = L_n(f+\delta f;x) - L_n(f;x) \quad . \tag{2.1}$$

$[a,b]$で有界な実数値函数 $f(x)$ のノルムを

$$\|f\| = \sup_x |f(x)| \quad , \quad x \in [a,b] \tag{2.2}$$

これに従属して，L_n のノルムを

$$\|L_n\| = \sup_f \|L_n(f;x)\| \quad , \quad \|f\| \le 1 \tag{2.3}$$

で定義する．$\delta f(x)$ は一般に実数値函数であって

$$\|\delta f\| \le \varepsilon_r \quad . \tag{2.4}$$

ここで ε_r は $f(x)$ の計算精度だけに依存する適当な正数．

明らかに $f(x)$ と無関係に

$$\|L_n(\delta f;x)\| \le \|L_n\|\|\delta f\| \le \|L_n\| \varepsilon_r \tag{2.5}$$

が成り立つ．したがって n が大なるときの伝播誤差は $\|L_n\|$ によって支配される．この事実は近似式が線形作用素を用いて表わされるときも成り立つ．一般に近似式 $L_n(f;x)$ をつくるときの近似法 (L_n) の安定，不安定，準安定を定義する：

1) 安定； $\|L_n\| < c \quad , \quad n = 1, 2, \cdots$

c；n に無関係な正数

2) 準安定； $\lim_{n\to\infty} \|L_n\| = \infty$ ，かつ $\lim_{n\to\infty} \|L_n\|^{\frac{1}{n}} = 1$

3) 不安定； L_n が上の 1)，2) の条件をみたさない場合．たとえば，$\|L_n\|$ が指数函数 ρ^n，$\rho > 1$ のオーダーで増大する場合は不安定である．

補間法の場合，補間点をどのようにとっても $\|L_n\| \ge A \log n$

（Aは適当な正の定数）である（1）．したがって補間法は準安定の場合だけが問題となる．近似式の最終的な誤差は，剰余項と伝播誤差の和であるから

$$\|L_n(f+\delta f;x)-f(x)\| \le \|L_n(f;x)-f(x)\| + \|L_n\|\varepsilon_r. \qquad (2.6)$$

$f(x)$に適当な条件をつければ $n\to\infty$のとき右辺の第一項（剰余項）は0に収束するが，第二項は$f(x)$のいかんを問わず∞に発散する．したがってεを許される誤差限界とするとき，近似式 $L_n(f+\delta f;x)$ が

$$\|L_n(f;x)-f(x)\| + \|L_n\|\varepsilon_r < \varepsilon \qquad (2.7)$$

をみたせば，所要の精度は保障される．上式をみたすnが存在しなければ$\delta f(x)$が単に有界な実数値函数であるから，所要の精度での近似は不可能となる．また補間式 $L_n(f;x)$ と最小二乗近似式 $S_n(x)$ の差違の観点からも

$$\|S_n(x)-L_n(f;x)\| \le \|L_n\|\|f-S_n\|$$

が成り立つので $\|L_n\|$ の発散のオーダーはゆるい程よい．

補間式の場合，L_nは補間点の分布だけに依存するので，点列 $\{x_k^{(n)}\}$ の分布函数 $\mu_n(x)$ を定義する：

$$\mu_n(x)=\frac{1}{n}\sum_{k=1}^{n}E(x-x_k^{(n)})$$
$$E(x)=\begin{cases}1 & ,\ x\ge 0\\ 0 & ,\ x<0\end{cases}. \qquad (2.8)$$

各 $x_k^{(n)}$ は有限閉区間 (a,b) 上の点とする．ただちに分布函

数の性質

1) $\mu_n(a)=0$, $\mu_n(b)=1$

2) $\mu_n(x)$ は非減少で右側から連続

が得られる. ある規則で $\{x_k^{(n)}\}$ をつくるとする. $n\to\infty$ のとき $\mu_n(x)\to\mu(x)$ で, かつ $\mu(x)$ が分布函数の条件 1), 2) をみたすならば $\mu(x)$ を $\{x_k^{(n)}\}$ の極限分布という.

$[-1,1]$ における Chebyshev 分布函数とは

$$\mu(x)=\frac{1}{\pi}\int_{-1}^{x}\frac{1}{\sqrt{1-t^2}}\,dt$$

をいう (2)). さらに

$$\omega_n(x)=\prod_{k=1}^{n}(x-x_k^{(n)}) \tag{2.9}$$

とおけば

$$|\omega_n(x)|^{\frac{1}{n}}=e^{-u_n(x)} \tag{2.10}$$

$$u_n(x)=\int_{-1}^{1}\log\frac{1}{|x-t|}\,d\mu_n(t). \tag{2.11}$$

$\|L_n\|$ を評価するためには, 問題の補間式を Lagrange の補間式の形に表わしておけばよい (1)).

$$L_n(f;x)=\sum_{k=1}^{n}l_k(x)f(x_k^{(n)}) \tag{2.12}$$

ただし $\quad l_k(x)=\omega_n(x)\Big/\left((x-x_k^{(n)})\,\omega'(x_k^{(n)})\right).$ $\quad$ (2.13)

$l_k(x)$ は区間 $[a,b]$ のとり方に関係しないので, $[-1,1]$ に標準化して考えてよい. しかも

$$\|L_n\| = \max_{x\in[a,b]} \sum_{k=1}^{n} |l_k(x)| \quad . \qquad (2.14)$$

以上で準備を終り，結論を示す．

定理．補間点の極限分布が Chebyshev 分布のときに限り，補間式の構成は準安定にできる．

証明．与えられた $f(x)$ の補間式を，まず Lagrange 補間式 (2.12) の形に表わしておく．いま補間点はすべて相異なるとする．

$$M_n = \max_{k\le n} \|l_k(x)\| \qquad (2.15)$$

とおけば，一定の n に対し $M_n < \infty$．(2.14) からすべての n に対し

$$M_n \le \|L_n\| \le n\, M_n \qquad (2.16)$$

が成り立つので，$M_n^{\frac{1}{n}} \to 1$ のときに限って $\|L_n\|^{\frac{1}{n}} \to 1$．

一方，次の補題が成り立つ〔2〕）．

補題　対数ポテンシャル (2.11) の極限が $[-1,1]$ 上ほとんでいたるところ定数 ($\log 2$) となるのは $\mu(x)$ が Chebyshev 分布のときに限る．

明らかに $w_n(x)$，$w_n(x)/(x-x_k^{(n)})$，$w_n'(x)$ の零点の分布は $n\to\infty$ のとき同一の分布函数 $\mu(x)$ に収束する．この事実と上の補題を用いれば，$w_n(x)$ の零点の極限分布 $\mu(x)$ が Chebyshev 分布のときに限り，ほとんどすべての点 $t\in[-1,1]$ に対し，$[-1,1]$ 上ほとんでいたるところで

$$\lim_{n\to\infty} \frac{1}{n} \log \left| \frac{\omega_n(x)}{(x-t)\,\omega_n'(t)} \right| = 0 \qquad (2.17)$$

が成り立つ．

とくに $t = x_k^{(n)}$ とおき，一点 $x_k^{(n)}$ だけを $[-1,1]$ で他の点 $\{x_j^{(n)}\}$ と重ならないよう動かしても $\{x_j^{(n)}\}$ の極限分布は変らないから上式は成り立つはずである．さらにノルムの定義 (2.2) を本質的上限と解釈すれば

$$\lim_{n\to\infty} M_n^{\frac{1}{n}} = 1. \qquad (2.18)$$

ゆえに $\mu(x)$ が Chebyshev 分布のときに限り

$$\lim_{n\to\infty} \| L_n \|^{\frac{1}{n}} = 1$$

が成立し，定理は証明された．

3．補間法による函数の直交多項式展開

補間点を1点づつ追加しながら補間多項式の列 $\{L_n(f;x)\}$ をつくる．この際 $\{L_n(f;x)\}$ のために要する函数値の計算回数はもちろんのこと，乗除算回数と記憶場所の占有量は，できるだけ少ない方が望ましい．そのために，まず $L_n(f;x)$ を Newton 補間式の形に表わす．Newton 補間式は，精度に応じ次数 n を機械的に決定するのに $f(x)$ が解析的な場合でも困難である．そこで，次に Newton 補間式を直交多項式系 $\{\varphi_r(x)\}$ で展開する．直交系が $\|\varphi_r\| = 1$ と標準化されていれば，n の機械的な決定はさ程困難ではない．

算法：極限分布がChebyshev分布となる点列の一構成法．

$$x_{n+1} - 2\lambda x_n + x_{n-1} = 0 \quad , \quad n = 1, 2, \cdots \tag{3.1}$$

$$x_0 = 1 , \quad x_1 = \lambda = \cos\alpha$$

ただし π / α は無理数（2),3)）．

1点補間点を追加すれば，Newton補間式の係数も一つ増える．この係数の漸化的計算法について述べる．補間式を

$$L_{n+1}(f, \tilde{\omega}; x) = L_n(f, \tilde{\omega}; x) + a_n \tilde{\omega}_n(x)$$

$$L_1(f, \tilde{\omega}; x) = f(x_1) = a_0 \quad , \quad n = 1, 2, \cdots$$

$$\tilde{\omega}_n(x) = 2^n (x - x_1)(x - x_2) \cdots (x - x_n)$$

の形で表わしておく．$L_n(f, \tilde{\omega}; x)$ の係数 $a_0, a_1, \cdots, a_{n-1}$ を与えて，上の漸化式をみたす a_n を求める：

初期条件　　$d_0 = f(x_{n+1}) - a_0 \; , \; a_n = 0$

漸化式　　$d_k = d_{k-1} / 2(x_{n+1} - x_k) - a_k$　　(3.2)

$$k = 1, 2, \cdots, n$$

これによって，求める係数は

$$a_n = d_n .$$

つぎに $a_n \tilde{\omega}_n(x)$ と $L_n(f, \varphi; x)$ を与えて $L_{n+1}(f, \varphi; x)$ を求めよう．$\{\varphi_n(x)\}$ は適当な三項漸化式にしたがうので

$$\alpha_{n-1} \varphi_{n-1}(x) - 2(\beta_n + x) \varphi_n(x) + \gamma_{n-1} \varphi_{n+1}(x) = 0 . \tag{3.3}$$

また $\tilde{\omega}_n(x)$ を直交展開して

$$\tilde{\omega}_n(x) = \sum_{k=0}^{n} u_k^{(n)} \varphi_k(x) \tag{3.4}$$

とおけば，漸化式 $\tilde{w}_n(x) = 2(x-x_n)\tilde{w}_n(x)$ より係数 $u_k^{(n)}$ に関しても次の漸化式が成り立つ．

$$u_k^{(n)} = \alpha_k u_{k+1}^{(n-1)} - 2(\beta_k + x_n) u_k^{(n-1)} + \gamma_k u_{k-1}^{(n-1)} \qquad (3.5)$$

$$u_n^{(n-1)} = u_{n+1}^{(n-1)} = 0, \quad k=2,3,\cdots,n$$

ただし $u_0^{(n)}, u_1^{(n)}$ だけは

$$u_0^{(n)}\varphi_0(x) + u_1^{(n)}\varphi_1(x) = \{\alpha_0 u_1^{(n-1)} + 2(x-x_n)u_0^{(n-1)}\}\varphi_0(x) + \{\alpha_1 u_2^{(n-1)} - 2(\beta_1+x_n)u_1^{(n-1)}\}\varphi_1(x)$$

が恒等的に成り立つように定める．また $u_0^{(1)}$ と $u_1^{(1)}$ は $\tilde{w}_1(x)$ の定義式より与える．$L_n(f,\varphi;x) \equiv L_n(f,\tilde{w};x)$ であるから $L_n(f,\varphi;x)$ の係数の漸化的計算法は，次の通り：

$$c_k^{(n+1)} = c_k^{(n)} + a_n u_k^{(n)}$$

$$c_n^{(n)} = 0, \quad c_0^{(1)} = f(x_1)/\varphi_0(x) \qquad (3.6)$$

$$k=0,1,\cdots,n, \quad n=1,2,\cdots.$$

$n+1$ を n に置き換えて，(3.1)，(3.2)，(3.5)，(3.6) の順序で計算すれば，近似式の列 $\{L_n(f,\varphi;x)\}$ が得られる．

計算の停止規則は二通り考えられる．収束の判定定数 ε を与えて，次の条件をみたすまで，n を増してゆく．

$$\|L_{n+1}(f,\varphi;x) - L_n(f,\varphi;x)\| < \varepsilon \qquad (3.7a)$$

$$\|c_{n-2}^{(n+1)}\varphi_{n-2}(x)\| + \|c_{n-1}^{(n+1)}\varphi_{n-1}(x)\| < \varepsilon . \qquad (3.7b)$$

とくに $\|\varphi_n\| = 1$ ならば，$\|\tilde{w}_n(x)\| \le \sum_k |u_k^{(n)}|$ であるから上の両式に対応して

$$|a_n| \sum_{k=0}^{n} |u_k^{(n)}| < \varepsilon \tag{3.8a}$$

$$|c_{n-1}^{(n+1)}| + |c_{n-1}^{n+1}| < \varepsilon . \tag{3.8b}$$

列 $L_n(f,\varphi;x)$, $n=1,2,\cdots,N$ のために要する演算回数は次の通りである.

関数値 $f(x)$ の計算回数 N. $\{\varphi_n(x)\}$ が Chebyshev 多項式系ならば, 漸化式 (3.3) の係数が 1 および 0 となるので, 乗算回数は節減できて, 約 $\frac{3}{2}N^2$ 回. 記憶場所は, 数列 $\{x_k\}$, $\{a_k\}$, $\{u_k^{(n)}\}$, $\{c_k^{(n)}\}$ のために約 $4N$ 個.

以上で計算法の説明を終る.

補間式の安定性について再論する. 補間点 x_n をつくるとき, 初期値 $\cos\alpha$ のいかんによって結果の精度はかなり異なる. パラメータ $\cos\alpha$ を次の立場で決定する. Newton 補間式の係数の誤差は

$$\sup_{\|f\|\le 1} |a_k| = \sum_{j=1}^{k+1} |\tilde{\omega}'_{k+1}(x_j)|^{-1} \tag{3.9}$$

によって支配される. これが小さい方が望ましい. 一定の $\cos\alpha$ と適当な自然数 n をとり

$$\max_{0\le k\le n} \{\sup_{\|f\|\le 1} |a_k|\} < \max_{0\le k\le n+1} \{\sup_{\|f\|\le 1} |a_k|\} \tag{3.10}$$

が成り立つとき, 左辺を $C_n(\cos\alpha)$ と書けば, これは高々 n 次の Newton 補間式をつくるときの困難性を示す指数である.

実践的には, 高々要求される次数 n を与えて

$$\inf_{\alpha} C_n(\cos\alpha) \tag{3.11}$$

によって $\cos\alpha$ を決定する方が望ましい．

上式は簡単に求められないので，数値実験を行なった．すなわち $\cos\alpha$ をパラメータとして $C_n(\cos\alpha)$ の値を求める．比較的大きな n に対して $C_n(\cos\alpha)$ が相対的に小さくなるような $\cos\alpha$ を多くの実験値から選びだした．これらの実験からは，$\cos\alpha = 0.4$ は相対的によいといえる(4))．

一例を示せば $C_{153}(0.4) = 2.62$，$C_{21}(0.3) = 725$，$C_{199}(0.6) = 5.22$．

4 応用例

まず Chebyshev 多項式系を用いる場合について述べる．具体的な直交系に依存しているところは (3.5) だけである．

$$f(x) \simeq {\sum_{k=0}^{n-1}}' c_k^{(n)} T_k(x) \quad , \quad \tilde{\omega}_n(x) = {\sum_{k=0}^{n}}' u_k^{(n)} T_k(x)$$

において，Σ' は第1項だけ $\frac{1}{2}$ 倍して和をとることを意味する．(3.5) は次のように簡単化される．

$$u_k^{(n)} = u_{k+1}^{(n-1)} - 2x_n u_k^{(n-1)} + u_{k-1}^{(n-1)}$$

$$u_0^{(0)} = 2, \quad u_n^{(n-1)} = u_{n+1}^{(n-1)} = 0$$

$$u_{-1}^{(n-1)} = u_1^{(n-1)}, \qquad k = 0, 1, \cdots, n, \quad n = 1, 2, \cdots .$$

(3.6) の初期条件だけは変更しなければならない：

$$c_0^{(1)} = f(x_1) .$$

つぎに Legendre 多項式の場合は

$$u_k^{(n)} = \frac{2(k+1)}{2k+3} u_{k+1}^{(n-1)} - 2x_n u_k^{(n-1)} + \frac{2k}{2k-1} u_{k-1}^{(n-1)}$$

$$u^{(n-1)}_{n} = u^{(n-1)}_{n+1} = 0 \quad , \quad u^{(0)}_{0} = 1$$

となる．

5．おわりに

数値実験の結果によれば，上述のChebyshev展開係数の精度は，離散的最小二乗近似式（Chebyshev展開）と比較して，さ程劣らない．項数nが小さい程，この傾向は，はっきりする．f(x)が十分滑らかならば，所要の精度に応じて，項数を機械的に決定することも，"経済的"に可能となっている．また特殊な定数表も必要としない．すなわち，所要の精度に応じて準最良近似式を構成することが，相対的に容易となった．

残された理論的問題を記す．

1) 点列 $\{x_{nk}\}$ の分布函数がChebyshev分布に収束する速さと $\cos\alpha$ の関係．

2) 上の分布函数の収束の速さと，補間式 $L_n(f;x)$ のノルム $\|L_n\|$ の発散の"速さ"との関連．

参考文献

1) Korovkin, P. P., Linear Operators and Approximation

Theory, Hindustan Publishing Corp., Dehli, (1960), Chap. 7. (英訳)

2) Klylov, V. I., Approximate Calculation of Integrals, The Macmillan Co., New York, 1962, Chap. 12. (英訳).

3) Davis, P. J., Interpolation and Approximation, Blaisdell Publishing Co., New York, 1963, Chap. 14.

4) 鳥居達生，準安定な補間過程の一構成法，情報処理 vol. 9. pp. 197～204, 1968.